

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа **Инженерная школа природных ресурсов**

Направление подготовки **18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии, профиль Основные процессы химических производств и химическая кибернетика**

Отделение школы (НОЦ) **Отделение химической инженерии**

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Математическое моделирование процесса алкилирования изобутана бутиленами

УДК 661.716.1.4.095.253:519.876

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Гиль Татьяна Алексеевна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Долганов И.М.	к.т.н., доцент		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Криницына З.В.	к.т.н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Белоеенко Е.В.	к.т.н., доцент		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Юрьев Е.М.	к.т.н., доцент		

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа **Инженерная школа природных ресурсов**

Отделение школы (НОЦ) **Отделение химической инженерии**

Направление подготовки **18.03.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии**

Профиль **Основные процессы химических производств и химическая кибернетика**

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП

 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ **на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
2К51	Гиль Татьяна Алексеевна

Тема работы:

Математическое моделирование процесса алкилирования изобутана бутиленами	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 1131/с от 13.02.2019
Срок сдачи студентом выполненной работы:	

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i>	Установка сернокислотного алкилирования изобутана бутиленами 25/12. Сырьем для установки являются изобутановая и бутан-бутиленовая фракции с установки ГФУ. Режим работы – непрерывный. Установка предназначена для производства алкилбензина по технологии лицензированной фирмой «СТРАТКО».
--	--

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Реферат Введение 1 Литературный обзор 2 Объект и методы исследования 3 Экспериментальная часть 4 Расчет реактора алкилирования изобутана бутиленами 5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 6 Социальная ответственность Заключение Список литературы Приложение</p>
<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <i>(с указанием разделов)</i></p>	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Криницына З.В.
Социальная ответственность	Скачкова Л.А.
<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>	

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	
--	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Долганов Игорь Михайлович	к.т.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Гиль Татьяна Алексеевна		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
2К51	Гиль Татьяна Алексеевне

Школа	ИШПР	Отделение(НОЦ)	ОХИ
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	18.03.02. Энерго - и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Работа с информацией, представленной в российских и иностранных научных публикациях, аналитических материалах, статистических бюллетенях и изданиях, нормативно-правовых документах; анкетирование; опрос
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала проекта	Проведение предпроектного анализа. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта
2. Разработка устава научно-технического проекта	Определение целей и ожиданий, требований проекта. Определение заинтересованных сторон и их ожиданий.
3. Планирование процесса управления проектом: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Составление календарного плана проекта. Определение бюджета НИИ. Проведение оценки экономической эффективности исследования низина в модельных растворах

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2K51	Гиль Татьяна Алексеевна		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2K51	Гиль Татьяне Алексеевне

Школа	ИШПР	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	18.03.02. Энерго - и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии

Тема ВКР:

Математическое моделирование процесса алкилирования изобутана бутиленами	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p>Объект исследования – процесс алкилирования изобутана бутиленами</p> <p>Область применения – нефтехимическая промышленность.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> - "Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019) - СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. - ГН 2.2.5.3532-18. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны. - СНиП 21-01-97 Пожарная безопасность зданий и сооружений
<p>2. Производственная безопасность:</p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<p>1. Отклонение показателей микроклимата;</p> <p>2. Повышенный уровень шума;</p> <p>3. Электрический ток;</p> <p>4. Утечка вредных веществ;</p> <p>5. Недостаточная освещенность рабочей зоны</p>
<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<p>– На атмосферу влияют вредные вещества, которые выделяются или используются во время работы аппарата - Вредные воздействия на гидросферу и литосферу не воздействуют.</p>

4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	Возникновение ЧС, требующих обеспечение электро- и пожаро-взрывобезопасности на рабочем месте. Перечень возможных ЧС: - пожар; - взрыв; - розлив продуктов / компонентов производства;
--	--

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Белоенко Е. В.	К.Т.Н		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2К51	Гиль Т. А.		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии»

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
P1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности.
P2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач.
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии.
P4	Разрабатывать технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий
P6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.
P9	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.

Реферат

Дипломный проект содержит 90 страниц машинописного текста, 25 рисунков, 19 таблиц, 47 источников литературы, 6 приложений.

Выпускная квалификационная работа «Математическое моделирование процесса алкилирования бутиленами».

Ключевые слова: алкилирование изобутана бутиленами, сернокислотное алкилирование, изооктан, алкилат, нестационарная математическая модель, термодинамический анализ, кинетическая модель.

Объектом работы является установка алкилирования изобутана бутиленами.

Цель работы – разработка математической модели алкилирования изобутана бутиленами.

В работе выполнен термодинамический и кинетический анализ реакций, протекающих в реакторе алкилирования изобутана бутиленами, разработана нестационарная математическая модель процесса алкилирования изобутана бутиленами.

Основной метод, применяемый в работе – метод математического моделирования.

Модель объекта строилась с учетом физико-химических закономерностей протекания процесса.

Степень внедрения: полученные результаты положены в основу компьютерной моделирующей системы процесса сернокислотного алкилирования, апробированной на промышленной установке.

Областью применения модели является нефтехимическая промышленность.

Содержание

Введение	12
1 Литературный обзор.....	13
1.1 Современные процессы алкилирования.....	13
1.2 Катализаторы жидкофазного алкилирования	22
2 Объект и методы исследования	25
2.1 Химизм процесса алкилирования изобутана бутиленом	25
2.2 Сырье процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом	28
2.3 Основополагающие факторы алкилирования изобутана бутиленом	28
2.4 Реакторы алкилирования изобутана бутиленами	32
3 Экспериментальная часть	35
3.1 Определение термодинамических параметров реакций сернокислотного алкилирования	35
3.2 Кинетическая модель процесса сернокислотного алкилирования	36
3.3 Математическая модель реактора сернокислотного алкилирования	37
3.4 Результаты и их обсуждения	38
3.5 Выводы по составленной модели процесса алкилирования изобутана бутиленами	44
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение ...	46
4.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	46
4.2 SWOT – анализ	47
4.3 Планирование научно-исследовательских работ	48
5 Социальная ответственность	60
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	60
5.2 Производственная безопасность.....	61
5.3 Анализ выявленных вредных факторов при разработке, изготовлении и эксплуатации установки алкилирования	62
5.4 Экологическая безопасность	66

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	68
Заключение	71
Список использованных источников	73
Приложение А	78
Приложение Б	82
Приложение В	84
Приложение Г	86
Приложение Д	88
Приложение Е	90

Введение

В настоящее время в нефтеперерабатывающей промышленности образуется большое количество газообразных олефинов, которые можно использовать в качестве сырья для процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутан-бутиленовой фракцией, как наиболее распространенного вида алкилирования в России. Целью данного процесса является получение высокооктанового компонента топлива – алкилата [1]. Следовательно, необходимо совершенствование данного процесса для увеличения конкурентоспособности предприятий и расширения рынка сбыта.

Наиболее экономически выгодным способом совершенствования процесса алкилирования является создание нестационарной математической модели. С помощью этой модели возможно оптимизировать процесс, прогнозировать выход продуктов при изменении технологических параметров, а также обучать персонал для повышения его квалификации, что также скажется на совершенствовании процесса алкилирования в целом.

Качественная математическая модель процесса алкилирования позволит создать и настроить технологический режим установки с высоким выходом целевых продуктов и высокой селективностью процесса, что существенно уменьшит цену на конечный продукт.

Для создания математической модели необходимо знать зависимости термодинамических и кинетических параметров от регулируемых (давление, температура) для того, чтобы оптимизировать модель и убрать факторы, которые не влияют на результаты расчета [2].

Целью данной дипломной работы является разработка и анализ нестационарной математической модели сернокислотного алкилирования чувствительной к изменению состава сырья и технологических параметров.

1 Литературный обзор

Каталитические реакции, при которых соединения, содержащие алкильные группы, реагируют с соединениями, не содержащими алкильных групп, и происходит изменение положения алкильных групп, и даже все процессы, при которых в молекуле какого-либо вещества вводится алкил, называют реакциями алкилирования. Алифатические и ароматические углеводороды можно алкилировать этиленом. Парафины алкилируются непредельными углеводородами в алкилзамещенные предельные углеводороды. Алкильные группы свободно вводятся в ядро ароматических соединений, например, бензола, фенола, нафталина и т.д. Также для алкилирования в роли алкильных групп могут выступать алифатические спирты, циклогексанол или эфиры.

Алкилирование позволяет получать насыщенные углеводороды изостроения с высоким октановым числом и поэтому имеет промышленное значение. Каталитическое алкилирование изобутана этиленом и бутиленом дает хороший выход изооктана с высоким октановым числом.

1.1 Современные процессы алкилирования

В данном подразделе содержатся наиболее значимые для промышленности процессы алкилирования.

1.1.1 Процесс алкилирования бензола этиленом

В настоящее время в нефтехимической промышленности этилбензол используется в качестве сырья для получения полистирола, в качестве промежуточного вещества при синтезе стирола, а также в качестве сырья для получения синтетических каучуков и АБС-пластиков.

В современной промышленности существуют два метода алкилирования бензола этиленом [1]:

- метод газофазного алкилирования. Данный метод основан на протекании процесса в газовой фазе на алюмосиликатных или цеолитных катализаторах.

Преимущество алкилирования бензола этиленом на цеолитном катализаторе заключается в том, что возможно применение газов с концентрацией этилена до 10 %. В данном процессе выход продукта практически аналогичен стехиометрическому.

Цеолитный катализатор обладает высокой селективностью по этилбензолу, однако в противовес высокой селективности выступает высокая энергозатратность – процесс протекает при температурах от 380 до 420°C [1].

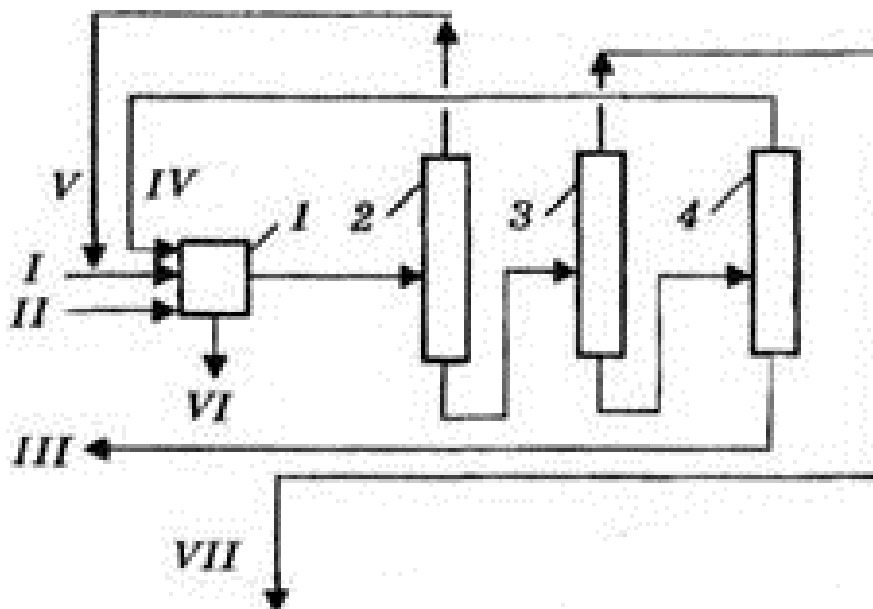


Рисунок 1.1 – Технологическая схема производства этилбензола на цеолитных катализаторах: I – бензол; II – этилен; III – котельное топливо; IV – полиэтилбензолы; V – рециркулирующий бензол; VI – отходящий газ; VII – этилбензол [2]

Реакционная смесь, состоящая из бензола и этилена, подается в двухступенчатый реактор 1 с цеолитным катализатором для алкилирования. Далее в реакционной колонне 2 отбираем непрореагировавший бензол на рециркуляцию. Реакционная смесь из реакционной колонны 2 поступает в реакционную колонну 3, где отбираем этилбензол. Оставшаяся смесь поступает

в реакционную колонну 4, где разделяется на полиэтилбензол, который возвращается в двухступенчатый реактор 1, и котельное топливо.

- метод жидкофазного алкилирования. Данный метод основан на протекании процесса в жидкой фазе, в качестве катализатора используются галогениды амфотерных металлов (FeCl_3 , AlCl_3 и т.д.), а также некоторые кислоты (H_2SO_4 , H_3PO_4). Процесс протекает в соответствии с реакцией Фриделя-Крафтса.

Жидкофазное алкилирование бензола этиленом с использованием стационарного слоя катализатора, состоящего из цеолита, способно обеспечить выход этилбензола в районе 99,5 % при чистоте сырья 99,9 % [1].

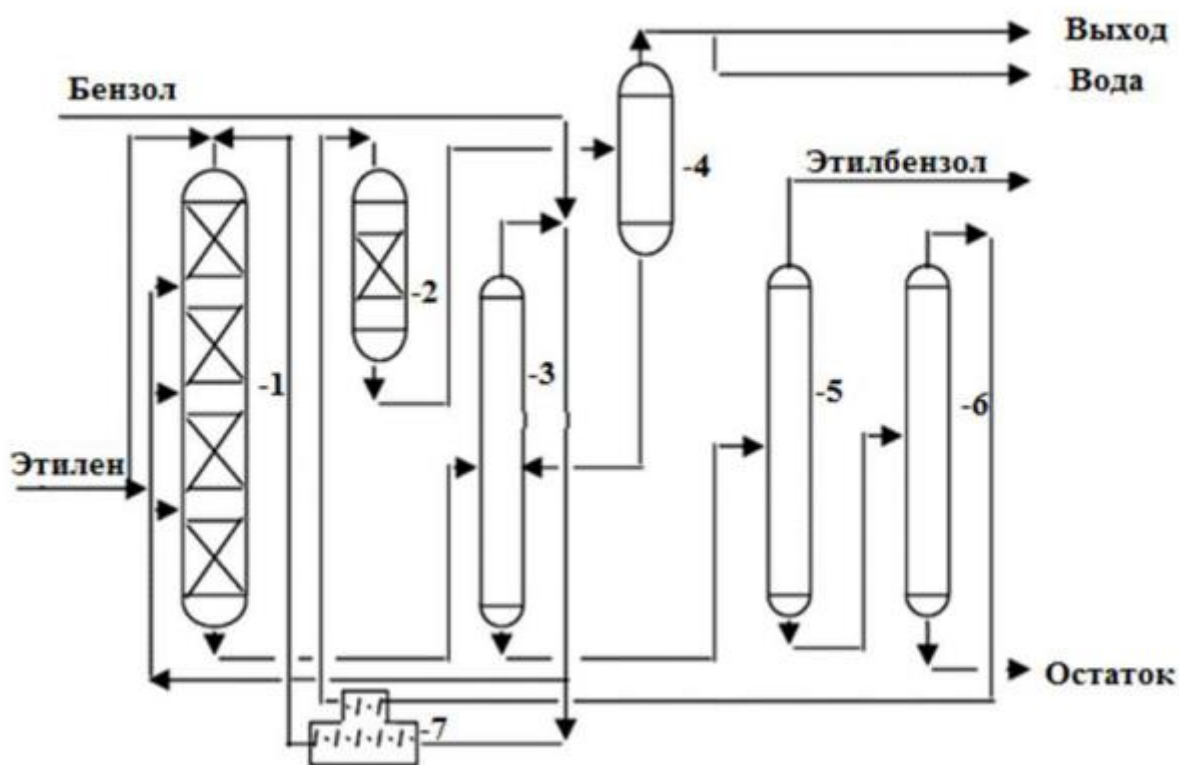


Рисунок 1.2 – Технологическая схема производства этилбензола на стационарном слое катализатора: 1 – реактор алкилирования; 2 – реактор трансалкилирования; 3,4,5,6 – ректификационная колонна; 7 – подогреватель [3]

Исходное сырье, состоящее из этилена и бензола, поступает в реактор алкилирования 1 через подогреватель 7. Далее смесь продукта и непрореагировавшего сырья поступает в ректификационную колонну 3, где

дистиллятом является бензол, а кубовый остаток направляется в колонну 5, где сверху колонны отбирается этилбензол, а кубовый остаток направляется в колонну 6, где производные этилбензола отделяются от дифенилметана и дефинилэтана. Производные этилбензола из колонны 6 попадают в реактор 2 через подогреватель 7, где трансалкилируются и направляются в колонну 4.

Рассмотрим математическую модель процесса алкилирования бензола этиленом на катализаторе AlCl_3 . Данный процесс протекает в реакторе полочного типа с неподвижным слоем катализатора.

Для описания процесса рассмотрим квазигомогенную стационарную модель реактора [4]. Математическая модель должна состоять из гидродинамической, термодинамической и кинетической составляющих. Примем, что гидродинамика описывается уравнением идеального вытеснения [4]. Уравнение гидродинамики идеального вытеснения представляет собой:

$$\frac{dC_i}{dt} = -u \cdot \frac{dC_i}{dl}$$

Уравнение материального баланса для i -го компонента в стационарном режиме будет иметь следующий вид:

$$-u \cdot \frac{dC_i}{dl} = W_i$$

где C_i – концентрация i -го компонента;

l – длина реактора;

u – линейная скорость потока;

W_i – скорость реакции по i -му компоненту.

Уравнение теплового баланса адиабатического реактора идеального вытеснения в стационарном режиме будет иметь следующий вид:

$$-u \cdot \frac{dT}{dl} \cdot \rho \cdot C_p = \sum_{j=1}^N (W_j \cdot \Delta H)$$

где T – температура протекания процесса;

l – длина реактора;
 u – линейная скорость потока;
 ρ – плотность смеси;
 C_p – теплоемкость смеси;
 W_j – скорость j -ой реакции.

При одновременном решении данных уравнений будут получены профили температуры, давления и концентрации компонентов в каждом слое катализатора. Теплоемкость и изменение энтропии рассчитываются путем измерения температуры.

В связи с отсутствием точного описания кинетики процесса алкилирования бензола этиленом, следует применить оптимизационный метод случайного поиска (MATLAB). Для этого целевая функция определяется как разница между данными, полученных из модели, и экспериментальными.

1.1.2 Процесс алкилирования изобутана бутиленом

Процесс алкилирования изобутана бутиленом служит для получения бензиновых фракций с высоким октановым числом, которые обладают высокой стабильностью и детонационной стойкостью. Сырьем для данного процесса служит изобутан и бутан-бутиленовая фракция (ББФ), а также пропан-пропиленовая фракция.

В современной промышленности используются два основных метода получения алкилата [5]:

- алкилирование изобутана ББФ в присутствии серной кислоты. Сырьем для данного процесса является изобутан с газофракционирующей установки и ББФ в соотношении 7:1 или 12:1. В качестве катализатора и дисперсионной среды выступает 98 % - ная серная кислота [5]. Процесс протекает в реакторах смешения с выделением большого количества тепла, в следствии этого в реакторах следует поддерживать температуру от 4 до 13°C. Давление в реакторе при таких низких температурах не оказывает существенного влияния на выход продукта, поэтому его поддерживают

немного больше, чем давление насыщенных паров используемых углеводородов при данной температуре для поддержания их в жидкой фазе.

- алкилирование изобутана ББФ в присутствии плавиковой кислоты. Сырьем данного процесса является изобутан и пропилен, бутилен или амилен. Процесс протекает при температуре 32°C. Давление в установке поддерживается от 0,7 до 0,8 МПа для поддержания углеводородов и катализатора в жидкой фазе.

Основными достоинствами алкилирования в присутствии плавиковой кислоты, в сравнении с серной кислотой, являются [6]:

- высокая селективность по целевым реакциям;
- высокая степень конверсии и качество продукта;
- существенно меньший расход катализатора;
- более высокие температуры протекания процесса;
- HF легче регенерируется, чем H_2SO_4 .

За рубежом в последнее время разрабатывается процесс алкилирования на твердом катализаторе, который называется «Алкилен». В качестве катализатора используется широкопористый цеолит и BF_3 или $AlCl_3$, а также широкопористое кристаллическое сито и Al_2O_3 или SiO_2 . Недостатками тв. катализаторов, применяемых в этом процессе, являются [7]:

- быстрый унос галогена;
- высокая скорость дезактивации, что приводит к снижению выхода продукта и его качества.
- для уменьшения скорости дезактивации катализатора следует более глубокая очистка сырья: помимо блока неглубокого селективного гидрирования для удаления серы и ее соединений необходим блок удаления кислородсодержащих и азотсодержащих соединений. Это в свою очередь приводит к увеличению эксплуатационных затрат.

Рассмотрим технологическую схему алкилирования изобутана бутиленом на примере алкилирования в присутствии серной кислоты.

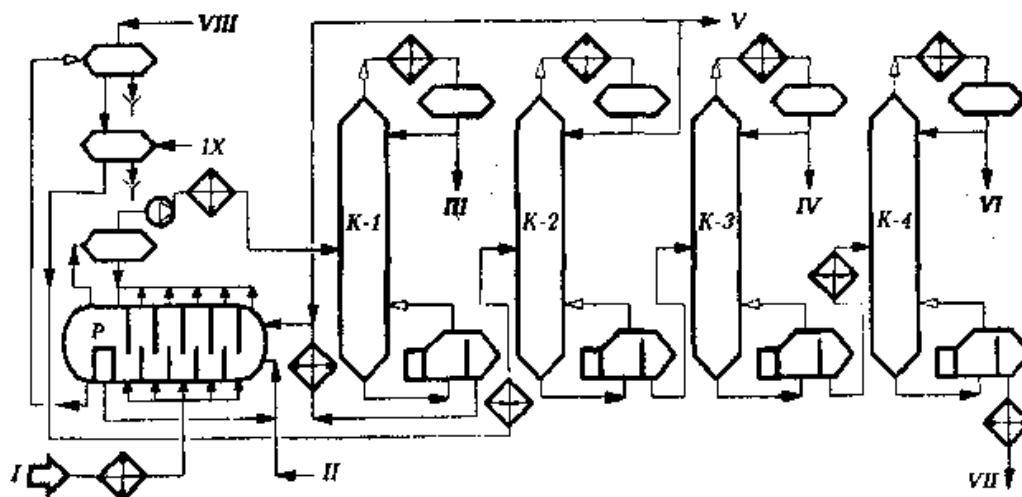


Рисунок 1.3 – Технологическая схема алкилирования изобутана бутиленами в присутствии серной кислоты: I – сырье; II – свежая кислота; III – пропан; IV – бутан; V – изобутан; VI – легкий алкилат; VII – тяжелый алкилат; VIII – раствор щелочи; IX – вода [8]

Сырье, состоящее из изобутана и ББФ, после очистки подается в реактор алкилирования Р, где смешивается с серной кислотой. Далее продукты алкилирования из реактора Р направляются на нейтрализацию щелочью и промывку водой, затем попадают в колонну К-2 через теплообменник. Испарившиеся изобутан и пропан из реактора Р проходят через сепаратор и холодильник и затем направляются в колонну - депропанизатор К-1, сверху которой отбирают пропан, а снизу – отбирают непрореагировавший изобутан, который направляется на циркуляцию. В колонне К-2 отбирают изобутан на циркуляцию в качестве дистиллята, а кубовый остаток направляется в колонну – дебутанизатор К-3, где сверху отбирается бутан, кубовый остаток направляют в колонну К-4. В колонне К-4 происходит отделение легкого алкилата сверху колонны и тяжелого алкилата снизу колонны.

1.1.3 Процесс алкилирования бензола высшими олефинами

Линейный алкилбензол (ЛАБ) является промежуточным продуктом при синтезе моющих средств и как правило производится путем алкилирования бензола олефинами с длинными углеродными цепями от C_9 до C_{14} .

В настоящее время существует четыре основных промышленных способов получения линейных алкилбензолов [9]:

- дегидрирование фракции $C_9 - C_{14}$ n-парафинов с получением олефинов для дальнейшего алкилирования бензола в присутствии катализатора HF;
- дегидрирование фракции $C_9 - C_{14}$ n-парафинов с получением олефинов для дальнейшего алкилирования бензола на стационарном слое тв. Ох-катализатора;
- получение хлорпарафинов, путем хлорирования фракции $C_9 - C_{14}$ n-парафинов, с последующим применением их для алкилирования бензола в присутствии $AlCl_3$;
- алкилирование бензола с помощью покупных нормальных олефинов $C_9 - C_{14}$ с использованием HF в качестве катализатора.

В современной промышленности около 80 % ЛАБ производятся первым методом – дегидрирование фракции $C_9 - C_{14}$ n-парафинов с получением непредельных углеводородов для дальнейшего алкилирования бензола дегидрогенизатором в присутствии катализатора фтороводородной кислоты [9].

Алкилирование бензола высшими олефинами с использованием в качестве катализаторов $AlCl_3$ и жидкого HF морально устаревает [10, 11]. На смену этим катализаторам пришел новый, более совершенный катализатор DA-112, в основе которого лежит силикат алюминия и магния.

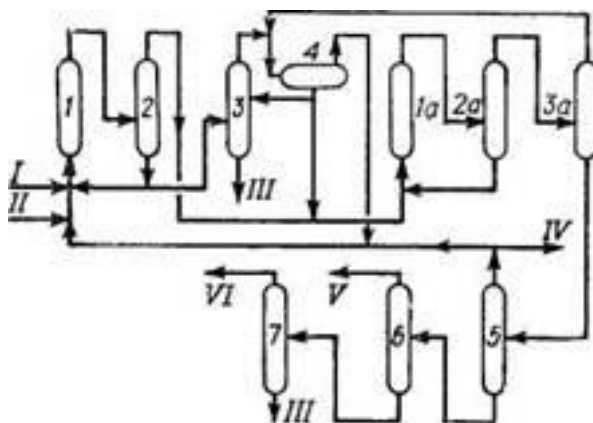


Рисунок 1.4 – Технологическая схема производства ЛАБ: I – бензол; II – олефин-парафиновая смесь; III – тяжелый алкилат; IV – циркулирующий бензол; V – парафины на дегидрирование; VI – моноалкилбензолы [7].

Сырье, состоящее из бензола и олефин-парафиновой смеси, смешиваясь с циркулирующим бензолом, поступает в алкилатор 1. Далее реакционная смесь попадает в отстойник 2, где отделяется нижний слой, содержащий HF, который затем отправляется на регенерацию в колонну 3. В колонне 3 отбирают дистиллят и тяжелый алкилат. Дистиллят попадает в отстойник 4, где отбирается бензол, который отправляется на циркуляцию. Верхний слой отстойника 2, содержащий целевой продукт, поступает в алкилатор 1а. Далее реакционная смесь попадет в отстойник 2а, где происходит разделение непрореагировавшего бензола и целевого продукта. Целевой продукт направляется в отпарную колонну 3а, в которой отделяется HF, направляемый в отстойник 4, отпаренный целевой продукт поступает последовательно в колонны отгонки 5, 6, 7, где отгоняют бензол, парафины на дегидрирование и моноалкилбензолы соответственно.

Для описания данного процесса рассмотрим квазигомогенную модель. Процесс протекает в реакторе с неподвижным слоем катализатора. Исходя из результатов, представленных в источнике [12], кинетическая составляющая математической модели процесса алкилирования бензола высшими олефинами определяется на основе экспериментальных данных по принципу математической статистики.

Материальный баланс процесса алкилирования с учетом всех допущений имеет следующий вид:

$$\frac{dM_i x_{i,j}}{dt} = V_{j+1} + L_{j-1} + F_j - (1 + r_j^V) V_j - (1 + r_j^V) L_j + \sum_{k=1}^r \sum_{i=1}^c v_{i,k} R_{k,j} \varepsilon_j$$

где M – молярная концентрация i -го компонента;

x – молярная доля компонента;

V – расход пара;

L – расход жидкости;

F – расход сырья;

r_j - отношение расхода бокового потока к расходу между ступенями;

v – стехиометрический коэффициент;

$R_{k,j}$ – скорость химической реакции;

ε – вес катализатора;

c – номер компонента;

r – номер реакции.

Сравнивая стационарную и нестационарную модель процесса, можно сделать вывод, что для проектирования и оптимизации процесса и установки нестационарная модель подходит лучше, чем стационарная, в связи с тем, что в реальных условиях равновесие в процессе практически никогда не достигается [13, 14].

1.2 Катализаторы жидкофазного алкилирования

В промышленных масштабах алкилирование целесообразно проводить в присутствии катализаторов. В зависимости от агрегатного состояния катализатора различают процессы алкилирования на твердых и жидкофазных катализаторах.

От выбранного катализатора зависят параметры технологического процесса такие как давление, температура, а также химическая чистота реагентов.

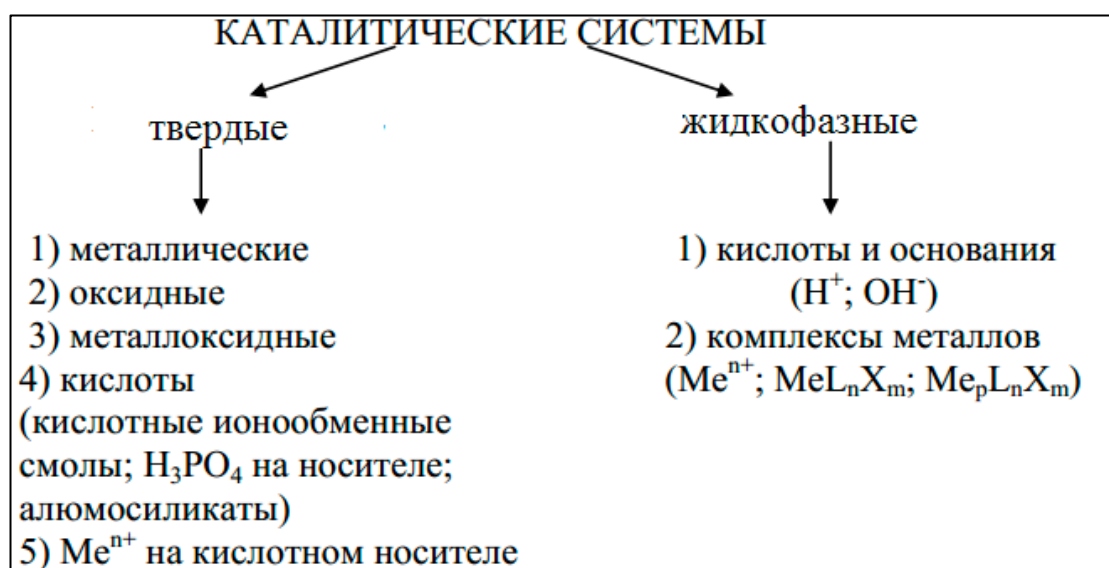


Рисунок 1.5 – Классификация катализаторов для процесса алкилирования [6]

Природа катализатора и технологические параметры влияют на механизм протекания реакции алкилирования, однако несмотря на это все реакции алкилирования с использованием катализатора протекают по ионному механизму [15].

Технологическое оформление процесса алкилирования также зависит от выбора катализатора. Так, например, при использовании твердого катализатора возможно упростить процесс и снизить конечную стоимость продукта за счет отказа от блока нейтрализации и промывки реакционной смеси.

К жидкофазным катализаторам для процесса алкилирования относятся плавиковая и серная кислоты. В таблице 1.1 приведены физико-химические свойства этих катализаторов.

Таблица 1.1 – Физико-химические свойства HF и H₂SO₄ [16]

<div> <div>Тип катализатора</div> <div>Физико-химические свойства</div> </div>	H ₂ SO ₄ (98 %)	HF (50 %)
Плотность, кг/м ³	1836,5	1155 (при 20°C)
Температура плавления, °C	0,1	-83,4
Температура кипения, °C	332,4	19,4
Вязкость, мПа·с	24,5 (при 25°C)	0,53 (при 0°C)
Поверхностное натяжение, Н/м	55·10 ⁻³ (при 25°C)	10,1·10 ⁻³ (при 0°C)
Диэлектрическая постоянная	114 (при 25°C)	86 (при 0°C)
Функция кислотности Гаммета	-9,85	-10,2 (100%)
Массовая растворимость изобутана, %	0,070 (при 25°C)	1,44 (при 13°C)

Эффективность жидкофазного катализатора зависит от его активности. Протонирующая способность HF значительно ниже, чем у H₂SO₄, при равных концентрациях протонирующая способность серной кислоты примерно на два порядка выше, чем протонирующая способность фтороводорода. Однако

несмотря на это значение их диэлектрических постоянных приблизительно равны – концентрация ионных пар мала. Более высокие значения таких физико-химических величин, как вязкость, плотность, а также поверхностное натяжение H_2SO_4 , в сравнении с HF , приводит к усложнению создания поверхности раздела фаз между серной кислотой и углеводородами. Одним из основных достоинств фтороводорода является значительно большая растворимость изобутана в нем, однако, скорость растворения олефинов превышает скорость растворения парафинов [17]. Исходя из того, что скорость растворения и растворимость изобутана в HF выше, чем в H_2SO_4 , то соотношение между изобутаном и алкеном в ядре реакционной зоны превышает это же соотношение если в качестве катализатора используется серная кислота. Из этого следует, что селективность фтороводородного катализатора значительно выше, чем у сернокислотного, а значит затраты на выделение целевого продукта значительно ниже.

Несмотря на все достоинства HF , более безопасным способом получения алкилата является его синтез на сернокислом катализаторе. Однако, данная технология синтеза алкилата является более энергозатратной, это связано с тем, что в процессе алкилирования образуется большое количество отработанной серной кислоты, которая в дальнейшем должна пройти регенерацию [18]. Это усложняет аппаратное оформление данной технологии и накладывает на нее дополнительные капитальные затраты, связанные с обслуживанием регенерирующих аппаратов. Несмотря на давнюю известность этой проблемы, каких-либо разработок для упрощения регенерации серной кислоты придумано не было.

На сегодняшний день в России повсеместно используется сернокислотное алкилирование, ввиду его меньшей токсичности.

2 Объект и методы исследования

В данном разделе содержатся теоретические основы промышленного процесса алкилирования и описание основных типов реакторов для данного процесса.

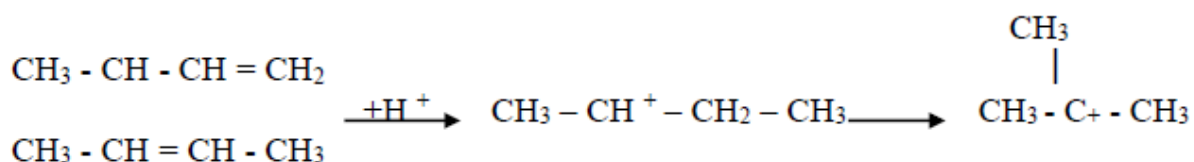
2.1 Химизм процесса алкилирования изобутана бутиленом

Реакция С-алкилирования относится к реакциям электрофильного присоединения. Данные реакции возможно проводить при высоких температурах, однако это менее целесообразно с экономической точки зрения, чем проводить реакции С-алкилирования в присутствии протонных катализаторов (серная и плавиковая кислоты). Так как на производстве для процесса алкилирования в качестве сырья используется изобутан и бутан-бутиленовая фракция, в основном состоящая из не менее 35 % различных изомеров бутилена, а также примерно из 6 % пропановой, пентановой фракций и других примесей, то продуктом является обширное количество веществ порядка 150 компонентов [19]. Процесс алкилирования изобутана бутиленом служит для получения моторных топлив с ОЧИ=90-98, ОЧМ=88-95.

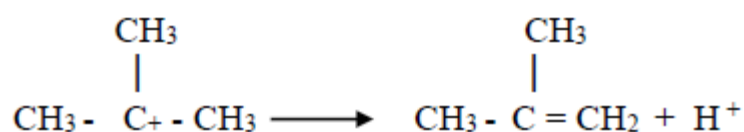
Так как данный процесс является экзотермическим и обладает тепловым эффектом примерно равным 90 кДж/моль [20], то существует необходимость отвода выделившегося тепла, в связи с тем, что максимальный выход целевого продукта в данном процессе достигается при температурах близких к 0°C.

Реакция С-алкилирования является многостадийной, ниже приведен механизм целевых реакций [21]:

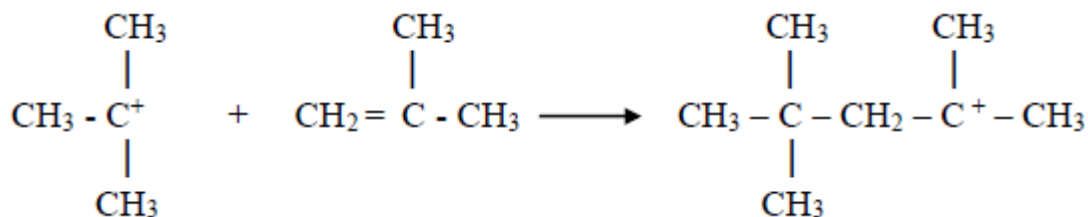
- первая стадия алкилирования изобутана бутил-1-еном и бутил-2-еном заключается в присоединении электрофила по месту разрыва двойной связи, причем электрофил присоединяется таким образом, чтобы заряд на образующемся карбкатионе максимально нивелировался индукционным эффектом алкильных групп, поэтому образующийся на первой ступени вторичный карбкатион изомеризуется в третичный:



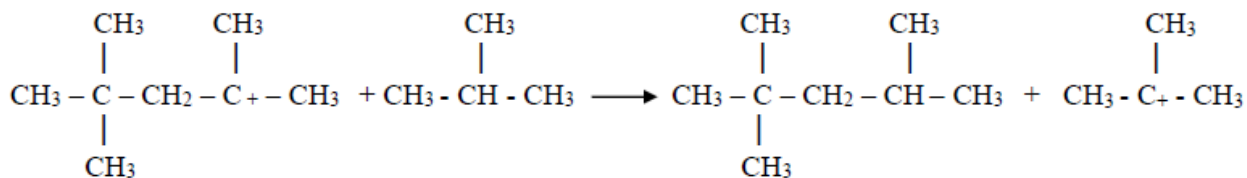
- вторая стадия заключается в отрыве электрофила от образовавшегося трет-бутильного карбкатиона в связи со стремлением к минимальному уровню свободной энергии. Данная стадия оканчивается образованием изобутилена:



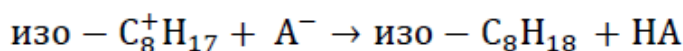
- третья стадия – так как стадия образования третичного карбкатиона идет быстрее, чем стадия образования изобутилена, то в реакционной массе начинает накапливаться избыток третичных карбкатионов, который в последствии взаимодействует с изобутиленом с образованием изооктил-иона:



- четвертая стадия – образовавшийся на третьей стадии изооктил-ион реагирует с молекулой изобутана с образованием бутил-изопропилметана (изооктан) и трет-бутильного карбкатиона:

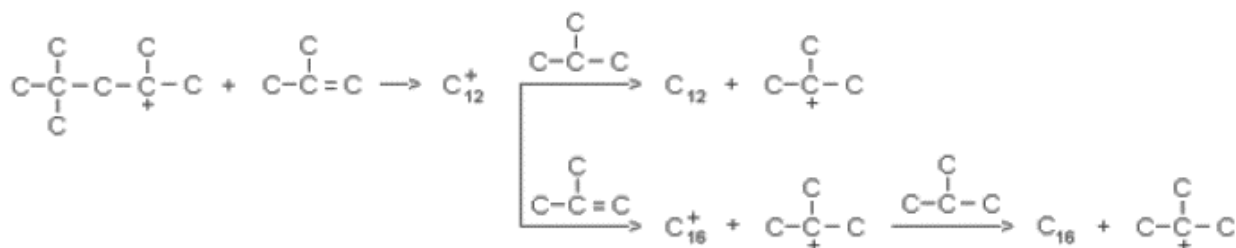


- пятая стадия заключается в отрыве электрофила от изооктильного карбкатиона и взаимодействии его с кислотным анионом:

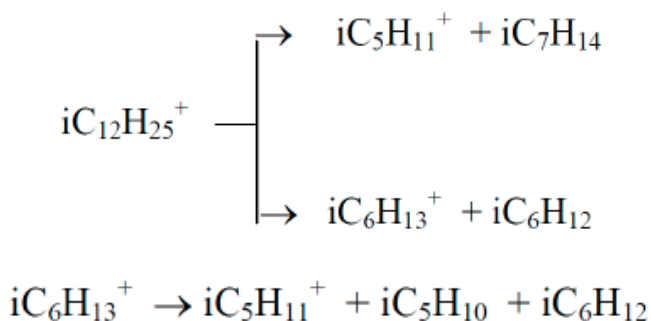


Побочные реакции снижают качество алкилата на выходе и дезактивируют катализатор. К побочным реакциям алкилирования изобутана ББФ в присутствии серной кислоты относятся [21]:

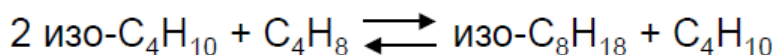
- реакции полимеризации непредельных углеводородов (алкенов). При недостатке циркулирующего изобутана в ядре реакционного потока происходит взаимодействие между олефинами и карбкатионами, что приводит к образованию высокомолекулярных алканов:



- реакция диспропорционирования (деструктурирование). Данная реакция основывается на распаде высокомолекулярных карбениевых ионов с образованием углеводородных цепей с количеством атомов углеродов равным от 5 до 7:



- реакция самоалкилирования. Данные реакции негативно сказываются на экономике всего процесса путем увеличения расхода изобутана и образования нежелательных изо-алканов с малым ОЧ:



- в зависимости от концентрации примесей возможно образование масел, растворимых в кислоте это приводит к дезактивации катализатора, а значит существенно увеличивает расход кислоты. В качестве таких примесей могут выступать: метанол, эфиры, МТБЭ, а также меркаптаны и вода.

2.2 Сырье процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом

В качестве сырья для процесса алкилирования изобутана возможно применение пропан-пропиленовой фракции, бутан-бутиленовой и пентан-амиленовой фракций, а также изобутана с установок газофракционирования [22].

Фракции пропан-пропиленовая и пентан-амиленовая практически не используются в качестве сырья в связи с меньшим ОЧ продуктов, однако, иногда их целесообразно применять с ББФ для повышения концентрации олефинов в реакционной смеси.

В данной работе используются данные о среднем составе сырья, поступающего в реакторный блок сернокислотного алкилирования изобутана ББФ.

2.3 Основополагающие факторы алкилирования изобутана бутиленом

В данном подразделе приведены основные факторы, влияющие на процесс алкилирования, качество конечного продукта и эффективность катализатора.

2.3.1 Разбавление сырья изобутановой фракцией

Исходя из стехиометрии реакции алкилирования изобутана ББФ, соотношение между расходами изобутана и олефинов равно 1:1, однако, для повышения качества конечного продукта, селективности, а также для снижения расхода катализатора соотношение между изобутаном и олефином должно составлять от 7:1 до 12:1 [19]. Дальнейшее увеличение кратности малоэффективно и приводит к экономической нецелесообразности, за счет увеличения эксплуатационных расходов на подачу изобутана и его охлаждение.

Такие примеси, как пропан и n-бутан, не участвующие в реакции, приводят к снижению концентрации изобутана в ядре реакционного потока, а значит и к понижению эффективности процесса алкилирования.

2.3.2 Объемная скорость реакции

Данный параметр не несет существенного влияния на процесс эксплуатации установки алкилирования. Однако, он учитывается при ее проектировании и оптимизации, а именно определяет геометрические размеры установки, количество контакторов в реакторном блоке. Также объемная скорость вносит существенный вклад в концентрацию алкенов в катализаторе и оказывает влияние на время пребывания этих фаз в реакторе.

Данный параметр равен отношению объемного расхода олефинов, вводимых в контактор, и объема серной кислоты в контакторе.

2.3.3 Температура в ядре реакционного потока

Реакции алкилирования являются экзотермическими, а значит обладает положительным тепловым эффектом. Так как экономически целесообразно проводить данный процесс при температуре от 4 до 13°C [23], то избыточное тепло необходимо отводить из реактора. Повышение температуры реакционной смеси приводит к полимеризации олефинов и к взаимодействию олефинов с серной кислотой, что в свою очередь негативно сказывается на качестве алкилата и увеличивает расход катализатора.

При снижении температуры ниже 4°C процесс отстаивания кислоты и углеводородов протекает значительно хуже, что приводит к уносу кислоты продуктовым потоком. Дальнейшее снижение температуры приводит к повышению вязкости серной кислоты и увеличению эксплуатационных расходов на ее перемешивание, а также приводит к повышенной скорости коагуляции.

2.3.4 Давление в реакционном контуре

В связи с тем, что реакции сернокислотного алкилирования целесообразно проводить при низких температурах, при которых величина избыточного давления в реакционном контуре не оказывает существенного влияния на протекание реакции, давление выбирают заведомо немного больше,

чем давление насыщенных паров углеводородов реакционного потока, для поддержания их в жидкой фазе при данной температуре.

2.3.5 Концентрация серной кислоты

В реакциях алкилирования изобутана ББФ используется 90-98 % серная кислота, это связано с тем, что при ее концентрации увеличивается выход целевого продукта, а значит и октановое число, что положительно сказывается на качестве продукта.

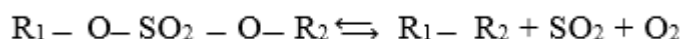
Серная кислота с концентрацией 100 % и выше приводит к тому, что олефины начинают вступать с ней в реакцию сульфирования, что повышает концентрацию побочных веществ в продуктовом потоке. Использование серной кислоты с концентрацией меньше 86 % приводит к ускорению реакций полимеризации, которые в свою очередь также понижают качество продукта.

В ходе работы реактора, концентрация катализатора может снижаться по следующим причинам [24]:

- концентрация серной кислоты снижается ввиду накопления в объеме реактора высокомолекулярных углеводородов (сложные эфиры, углеводороды фракций $C_9 - C_{16}$);
- снижение концентрации катализатора также происходит из-за разбавления его водой, которая попадает в реактор как с сырьевым потоком, так и образуется в ходе побочных химических реакций:



Диалкилсульфаты, находящиеся в отработанной серной кислоте могут распадаться с образованием кислорода:



Образующийся при этом кислород отбирает протон у углеводорода с образованием воды.

Как было написано ранее снижение концентрации катализатора приводит к снижению качества продукта, что несет за собой экономические потери.

Поэтому крайне важно поддерживать оптимальный режим работы реактора, а также дренировать емкости, в которых хранится изобутан и ББФ.

2.3.6 Насыщенность реакционной смеси в реакторе

Реакции сернокислотного алкилирования протекают в дисперсионной среде, в следствии этого необходимо гомогенизировать эмульсию, образующуюся между углеводородами и серной кислотой.

Серная кислота является адсорбентом, а углеводороды – адсорбатом соответственно. Для диспергирования данной эмульсии до однородного состояния в промышленности применяют различные виды перемешивающих устройств.

В промышленности принято соотношение между катализатором и углеводородами равным 1:1 [19, 23]. Повышение данного соотношения в сторону катализатора приводит к увеличению его вязкости, а, следовательно, и к увеличению затрат энергии на диспергирование. Повышение данного соотношения в сторону углеводородов приводит к образованию полидисперсной эмульсии с катализатором, что увеличивает его расход и снижает качество продукта.

Ненасыщенность реакционной смеси в реакторе на производстве определяют при помощи измерения разности давлений перед перемешивающим устройством и за ним.

2.3.7 Примеси в сырье процесса алкилирования изобутана бутиленами

В качестве сырья для сернокислотного алкилирования на производстве используется ББФ, которая содержит примеси, являющиеся либо инертными разбавителями реакционной смеси, либо дезактиваторами катализатора.

К таким примесям относятся n-парафины, которые обладают малой реакционной способностью (углеводороды от C_3 до C_5). Они, как описано в подпункте 2.3.5, снижают концентрацию изобутана и ББФ в реакционном потоке. Для снижения количества примесей на производстве используют

ректификационную колонну, в которой n-пропан отделяют от циркулирующего изобутана.

Бутадиен, подвергшийся алкилированию или поглощению серной кислотой, разбавляет последнюю, что снижает качество продукта и увеличивает расход катализатора.

Меркаптаны и сероводород, которые могут присутствовать в сырье, существенно увеличивают расход катализатора. Один килограмм таких примесей способен разбавить 65 кг 98 % H_2SO_4 до 90 % [19, 23]. Вода также разбавляет катализатор, 1 кг воды способен разбавить 11 кг 98 % H_2SO_4 до 90 % [19, 23].

2.4 Реакторы алкилирования изобутана бутиленами

Как было описано ранее, реакции алкилирования являются экзотермическими, а, следовательно, выделяют большое количество тепла, которое необходимо отводить из реакционного пространства. На сегодняшний день в промышленности используются два способа для отвода тепла из реакционного пространства [25, 26]:

- использование встроенных теплообменников. При данном способе отвода тепла внутри реактора помещают либо U-образные трубки, либо змеевик, через которые пропускают специальный хладагент, который охлаждает реакционную смесь. Также существуют вертикальные реактора с рубашкой. Рубашка также выполняет функцию отвода тепла;

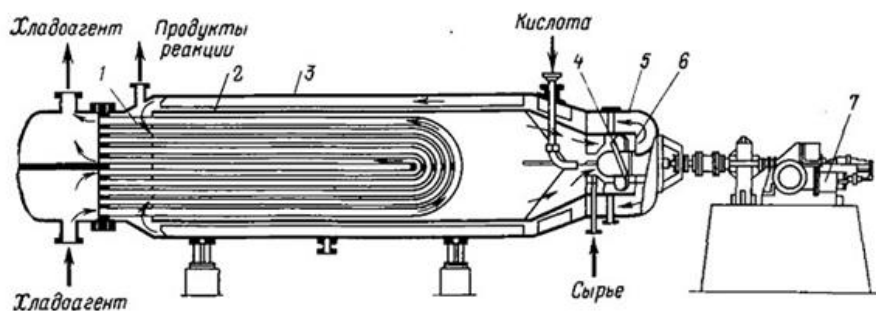


Рисунок 2.1 – Горизонтальный реактор сернокислотного алкилирования: 1 – трубчатка; 2, 5 – циркуляционная труба; 3 – корпус; 4 – перемещающее устройство; 6 – направляющие лопасти; 7 – привод [27]

- отвод тепла при помощи инжектирования в реакционное пространство реагентов, участвующих в процессе алкилирования (изобутан, ББФ, алкилат). Данный способ значительно упрощает эксплуатационные расходы путем упрощения конструкции реактора.

Для обеспечения интенсификации процесса теплообмена и для образования более качественной эмульсии в реакторы сернокислотного алкилирования устанавливают перемешивающее устройство.

Также на производствах получили распространения каскадные реакторы, разделенные на зоны смешивания и зоны отстоя. Каскадные реактора содержат 3 – 6 зон смешивания.

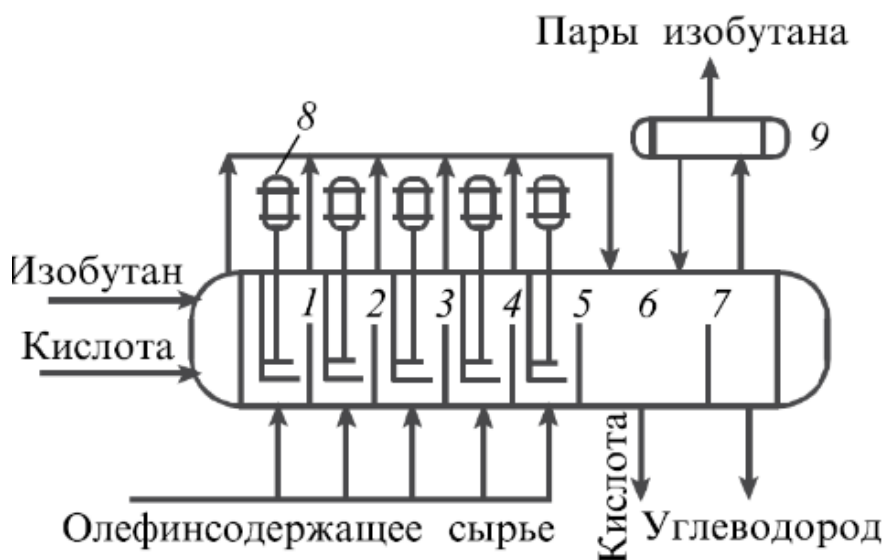


Рисунок 2.2 – Каскадный реактор сернокислотного алкилирования: 1 – 5 зоны смешивания; 6, 7 – зоны отстоя; 8 – перемешивающее устройство; 9 – сепаратор [28]

Основными достоинствами реактора данного типа являются [25]:

- простота конструкции;
- низкая себестоимость продукта;
- низкий расход катализатора (примерно в 2 раза ниже, чем в других реакторах);
- высокое качество целевого продукта (ОЧ на 2 – 4 пунктов больше, чем в других реакторах).

Однако несмотря на заявленные преимущества каскадные реактора также обладают рядом недостатков [26]:

- в следствии последовательного размещения зон смешения, при нарушении технологического режима в одной из зон, приводит к нарушению рабочего режима всего реактора;
- в каждой последующей зоне качество продукта снижается.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

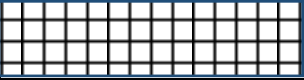
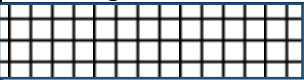


Целью данного раздела является проектирование и создание конкурентоспособных разработок и технологий, отвечающих предъявляемым требованиям в области ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование.

Целевой рынок – сегменты рынка, на котором будет продаваться в будущем разработка. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга). Можно применять географический, демографический, поведенческий и иные критерии сегментирования рынка потребителей, возможно применение их комбинаций с использованием таких характеристик, как возраст, пол, национальность, образование, любимые занятия, стиль жизни, социальная принадлежность, профессия, уровень дохода.

Производство	Вид услуги		
	Моделирование процесса	Рекомендации по реконструкции	Проектирование процесса
Нефтехимическое			
Фармацевтическое			
Пищевое			



- Омский НПЗ



- Березовский ФЗ



- КемТИПП

Рисунок 4.1 - Карта сегментирования рынка услуг

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование. На рисунке 4.1 представлена карта сегментирования рынка по потребности производства в плазмон-каталитических реакторах.

Таким образом, наиболее благоприятным сегментом и направлением для исследований является моделирование процессов, а также проектирование оборудования нефтехимических производств.

4.2 SWOT – анализ

Для комплексной оценки научно-исследовательского проекта необходимо составить SWOT-анализ, результатом которого является описание сильных и слабых сторон проекта, выявление возможностей и угроз для реализации проекта, которые проявились или могут появиться в его внешней среде.

Таблица 4.1 - Матрица SWOT-анализа по моделированию процесса серноокислотного алкилирования изобутана бутан-бутиленовой фракцией

	Сильные стороны проекта: С1. Высокая точность математической модели; С2. Более низкая стоимость производства по сравнению с испытаниями на стендовой и пилотной установках; С3. Наличие бюджетного финансирования; С4. Компьютерная реализация модели; С5. Близость разработки к завершенности.	Слабые стороны проекта: Сл1. Устаревшая технология, заложенная в модель; Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой; Сл3. Необходимость больших компьютерных ресурсов и времени для разработки модели; Сл4. Отсутствие современного оборудования для проведения испытания опытного образца.
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ; В2. Возможность модернизации модели для перехода на новые технологии; В3. Рост заинтересованности производителей в научно-технических разработках моделей процессов;	1. Разработка математической модели процесса алкилирования изобутана бутан-бутиленовой фракцией с целью перехода к более совершенным технологиям; 2. Проведение экспериментов в лабораториях ТПУ для проверки модели на адекватность; 3. Создание удобного интерфейса программы;	1. Постепенный переход к новым технологиям; 2. Повышение квалификации кадров у потребителя; 3. Использование кластера киберцентра ТПУ для снижения временных затрат на создание модели; 4. Приобретение необходимого оборудования опытного образца.

Продолжение таблицы 4.1

Возможности: В4. Долгосрочная стратегия развития отрасли на государственном уровне.	4. Создание тренажерной системы для сотрудников предприятия.	
Угрозы: У1. Внедрение других систем на предприятиях отечественных НПЗ; У2. Ограниченный рынок основного сырья (ББФ, изобутан); У3. Угроза снижения спроса на алкилат. У4. Отсутствие спроса; не заинтересованность предприятий по внедрению инновационного проекта	1. Продвижение новой технологии с целью появления спроса на усовершенствованную модель; 2. Сокращение временных затрат на создание модели; 3. Существенное расширение рынка основного сырья; 4. Развитие конкурентной среды.	1. Разработка научного исследования; 2. Повышение квалификации кадров у потребителя; 3. Приобретение необходимого оборудования опытного образца; 4. Продвижение новой технологии с целью появления спроса.

На основе SWOT-анализа были показаны проблемы, стоящие перед разработанной программой. Для проекта по моделированию процесса серноокислотного алкилирования характерен баланс сильных и слабых сторон, а также возможностей и угроз, т. е. разработанная модель находится в достаточно стабильных условиях.

4.3 Планирование научно-исследовательских работ

4.3.1. Структура работ в рамках научного исследования

Для выполнения научных исследований сформирована рабочая группа, в чей состав входят: бакалавр, в качестве инженера проекта; научный руководитель выпускной квалификационной работы. Составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведено распределение исполнителей по видам работ (Таблица 4.2).

После формулирования четырех областей SWOT переходят выявлению соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям. С помощью этих данных можно выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

Таблица 4.2 - Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	Инженер
Выбор направления исследований	3	Обзор современных методов исследований по выбранному направлению	Инженер
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, инженер
Теоретическое обоснование и проведение экспериментальных исследований	5	Теоретическое обоснование и выбор экспериментальных методов исследований	Руководитель, инженер
	6	Построение моделей и проведение экспериментов	Инженер
	7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Инженер
Обобщение полученных результатов, выводы по проделанной работе	8	Оценка эффективности проведенных исследований	Руководитель
	9	Определение целесообразности проведения ВКР	Инженер
<i>Проведение ВКР</i>			
Разработка технической документации и проектирование	10	Разработка модели и ее компьютерная реализация	Инженер
	11	Оценка эффективности	Инженер
	12	Сбор информации по охране труда	Инженер
	13	Подбор данных для выполнения экономической части работы	Инженер
Оформление отчета по ВКР	14	Составление пояснительной записки	Руководитель, инженер

Продолжение таблицы 4.2

Оформление отчета по ВКР	15	Сдача работы на рецензию	Инженер
	16	Предзащита	Инженер, руководитель
	17	Подготовка к защите дипломной работы	Инженер
	18	Защита дипломной работы	Инженер, руководитель

4.3.2. Определение трудоемкости выполнения работ

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов.

Для определения, ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ож\ i}$ используется формула:

$$t_{ож\ i} = \frac{3t_{min\ i} + 2t_{max\ i}}{5},$$

где $t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i – ой работы, чел. – дн.;

$t_{min\ i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной

i – ой работы, чел. – дн.;

$t_{max\ i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной

i – ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел. – дн.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{pi} = \frac{t_{ож\ i}}{q_i},$$

где T_{pi} – продолжительность выполнения одной работы, раб.дн.;

$t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел. – дн.;

$Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

4.3.3 Разработка графика проведения научного исследования

Коэффициент календарности равен $K_{\text{кал}} = \frac{365}{365 - (44 + 48) - 14} = 1,3$

Результаты расчетов занесены в таблице 4.3.

Таблица 4.3 - Временные показатели проведения научного исследования

№ работы	Трудоемкость работы			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях T_{pi}	Длительность в календарных днях T_{ki}
	t_{\min} , чел-дни	t_{\max} , чел-дни	$t_{\text{ож}},$ чел-дни			
1	1	1	1	Руков.,инженер	1	1
2	14	16	15	Инженер	15	20
3	5	7	6	Инженер	6	8
4	18	21	20	Руков.,инженер	10	13
5	10	14	12	Инженер	12	16
6	12	14	13	Руков.,инженер	7	9
7	7	10	8	Инженер	8	10
8	7	10	8	Руков.,инженер	4	5
9	22	25	23	Инженер	23	30
Итого	98	118	106		86	112

На основании таблицы 4.3 составляем календарный план-график, который наглядно показывает продолжительность работы исполнителей. План-график представлен в таблице Е.1 (Приложение Е).

4.3.4 Бюджет научно-технического исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных исследований
- основная заработная плата исполнителей темы;

- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

4.3.4.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$З_{\text{м}} = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m \text{Ц}_i \cdot N_{\text{расх}i}$$

$$K = 20\%$$

Материальные затраты, необходимые для данной разработки, отражены в таблице 4.4.

Таблица 4.4 - Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (З _м), руб.
Бумага	листов	100	1,5	180
Чернила для принтера	мл	100	1,1	132
Тетрадь	шт.	2	15	36
Ручка	шт.	3	75	270
Карандаш	шт.	2	35	84
Итого				702

4.3.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

Для выполнения научно-исследовательского проекта требуется приобрести персональные компьютеры для трех человек, ПО MicrosoftOffice 365 для создания документов, лицензионное программное обеспечение Gaussian и лицензионного программного пакета Delphi 7 для компьютерной реализации модели. Также требуется получить экспериментальные данные с завода, запросив их на нефтеперерабатывающем заводе или проведя испытания самостоятельно на кафедре.

Все расчеты по приобретению спецоборудования, включая 15% на затраты по доставке и монтажу, отображены в таблице 4.5.

Таблица 4.5 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
1	ПО Microsoft office	1	6	6
2	Borland Delphi 7	1	17	17
3	Gaussian DM Calculator v1.0	1	40	40
4	Компьютер	1	6,5	6,5
5	Принтер	1	4	4
Итого				73,5

Затраты по пунктам 1, 2, 3 таблицы 4.5 не учитываются по причине того, что программное обеспечение было приобретено ранее.

4.3.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья заработной платы исполнителей темы включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НИТ, (включая премии и доплаты) и дополнительную заработную плату. Также включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 – 30 % от тарифа или оклада:

$$З_{\text{ин}} = З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}},$$

где $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата;

$З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата (12 - 20 % от $З_{\text{осн}}$).

Основная заработная плата ($З_{\text{осн}}$) руководителя от предприятия рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{\text{осн}} = З_{\text{ин}} \cdot T_p,$$

где $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{ср}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}},$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб.дня $M=11,2$ месяца, 5 - дневная неделя;

при отпуске в 48 раб.дней $M=10,4$ месяца, 6 - дневная неделя;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн.

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{тс}} * k_p,$$

где $Z_{\text{тс}}$ – заработная плата по окладу, руб.;

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 для Томска.

Таблица 4.6 - Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные	44	48
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	56	28
- невыходы по болезни	2	2
Действительный годовой фонд рабочего времени	249	273

Расчет основной заработной платы приведен в таблице 4.7. Основная заработная плата руководителя (преподавателя ТПУ) с учетом должности

доцента и степени кандидата технических наук, и заработная плата инженера в роли студента без районного коэффициента, руб.:

Основная заработная плата рабочих:

- при 5 рабочих днях руководителя: 9066,5 руб.;
- при 65 рабочих днях инженера: 40274 руб.

Таблица 4.7 - Расчет основной заработной платы

Исполнители	Зб, руб.	к _р	З _м , руб.	З _{дн} , руб.	Т _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель	36300	1,3	47190	1970,99	5	9854,95
Инженер	28000	1,3	36400	1493,33	65	97066,45
Итого						106921,4

4.3.4.4 Дополнительная заработная плата исполнительной темы

Расчет дополнительной заработной платы проводится по надлежащей формуле:

$$З_{\text{доп}} = З_{\text{осн}} * k_{\text{доп}},$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы принимаем 0,12 из диапазона 0,12 – 0,15;

$З_{\text{доп}}$ руководителя: 1182,59 руб.;

$З_{\text{доп}}$ инженера: 11647,97 руб.

В сумме $З_{\text{доп}} = 12830,56$ руб.

В итоге заработная плата работников рассчитывается по формуле:

$$З_{\text{ит}} = З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}},$$

для руководителя: 11037,54 руб.;

для инженера: 108714,42 руб.

В статье расходов – отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления) отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина этих отчислений определяется по следующей формуле:

$$З_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{осн} + З_{доп}),$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Тарифы страховых взносов в 2018 году остались на прежнем уровне в соответствии с постановлением Правительства РФ от 26.11.2015 № 1265, т. е. есть общий совокупный тариф все также составляет 27,1%.

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 4.8.

Таблица 4.8 - Отчисления во внебюджетные фонды

Участник	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	9854,95	1182,59
Инженер-дипломник	97066,45	11647,97
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды, %	27,1	
Итого, руб.	руководитель: 2991,17; инженер: 29461,61	
В сумме	32452,78	

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование графических материалов, оплата услуг связи, электроэнергии, транспортные расходы и т.д. Их величина определяется по следующей формуле:

$$З_{накл} = (\text{сумма статей } 1 \div 5) \cdot k_{нр},$$

где $k_{нр}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов $k_{нр}$ допускается взять в размере 16%.

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект приведен в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Затраты на научно-исследовательский проект

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
1. Материальные затраты НТИ	702,0	Таблица 4
2. Затраты на специальное оборудование для научных работ	-	-
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	106921,4	Таблица 7
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	12830,56	Формула (9)
5. Отчисления во внебюджетные фонды	32452,78	Таблица 8
6. Затраты на научные и производственные командировки	-	-
7. Контрагентские расходы	1560	-
8. Накладные расходы	24714,68	16 % от суммы ст. 1-7
9. Бюджетные затраты НТИ	179181,42	Сумма ст. 1- 8

4.3.5 Определение эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ - интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{pi} - стоимость i-го варианта исполнения;

Φ_{max} - максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i$$

где I_{pi} - интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i - весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i - бальная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Таблица 4.10 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии \ Объект исследования	Весовой коэффициент параметра	Исп. 1	Исп. 2
1. Способствует росту производительности труда.	0,25	5	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителя).	0,15	4	3
3. Пригодность к исправлению ошибок	0,25	5	3
4. Стоимость разработки	0,15	4	2
5. Специфичность для конкретного производства	0,20	4	3
ИТОГО	1		

$$I_{p-исп1} = 0,25 \cdot 5 + 0,15 \cdot 4 + 0,25 \cdot 5 + 0,15 \cdot 4 + 0,2 \cdot 4 = 4,5$$

$$I_{p-исп2} = 0,25 \cdot 4 + 0,15 \cdot 3 + 0,25 \cdot 3 + 0,15 \cdot 2 + 0,2 \cdot 3 = 3,1$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{испи}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{испи} = \frac{I_{p-испи}}{I_{финр.и}}$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп1}}}{I_{\text{исп2}}}$$

Таблица 4.11 - Сравнительная эффективность разработки

№	Показатели	Исп. 1	Исп. 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	0,98
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,5	3,1
3	Интегральный показатель эффективности	4,13	3,16
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	1,31

В ходе выполнения данного раздела были определены финансовый показатель разработки, показатель ресурсоэффективности, интегральный показатель эффективности и, на основании сравнительной эффективности вариантов исполнения, оптимальным был выбран вариант исполнения 1.

Вывод:

В данном разделе был произведен анализ сильных и слабых сторон математической модели процесса, выявление возможностей и опасностей для ее реализации, оценили конкурентоспособность разработки в сравнении с уже существующими на рынке моделями. Также дали сравнительную оценку характеристикам различным аналогов и пришли к выводу, что разрабатываемая математическая модель наиболее оптимальна.

В результате выполненного анализа, можно сделать вывод, что разработка не уступает аналогам. Поэтому для конкурентоспособности нужно выявить зависимости октанового числа продукта от технологических параметров и отразить это в математической модели.

5 Социальная ответственность

Объектом исследования данной работы стала установка сернокислотного алкилирования изобутана олефинами.

Сырьем для установки служит бутан-бутиленовая фракция установок предприятия, содержащая около 50% олефинов и изобутановая фракция установки газофракционирования.

Данная дипломная работа выполнялась в аудитории 224, расположенная на втором этаже учебного корпуса 16-Б Томского политехнического университета. Аудитория 224 оборудована 11 ЭВМ. Экспериментальная часть бакалаврской работы осуществлялась на персональном компьютере (далее ПК) при работе с различными программными обеспечениями на кафедре химической технологии топлива и химической кибернетики. Рабочая зона представляет собой аудиторию, оборудованную системами отопления, кондиционирования воздуха. Освещение рабочего места комбинированное – сочетание естественного света из окон и искусственного.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Законодательство РФ об охране труда основывается на Конституции РФ и состоит из федерального закона, других федеральных законов и иных нормативных правовых актов субъектов РФ. Среди них можно выделить федеральный закон “Об обязательном социальном страховании от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний”. Для реализации этих законов приняты Постановления Правительства РФ “О государственном надзоре и контроле за соблюдением законодательства РФ о труде и охране труда”, “О службе охраны труда”, “О Федеральной инспекции труда” и др. [31].

Правильная организация рабочего места за компьютером прямо сказывается на производительности труда. Помещение должно быть просторным, хорошо проветриваемым и в меру светлым. Яркий солнечный свет порождает блики на мониторе, поэтому нужно предусмотреть жалюзи. По

гигиеническим нормам СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 [32] помещение в целом и рабочее место должны быть освещены достаточно и равномерно.

Экран видеомонитора должен находиться от глаз пользователя на оптимальном расстоянии 600 - 700 мм, но не ближе 500 мм с учетом размеров алфавитно-цифровых знаков и символов.

Уровень глаз при вертикально расположенном экране должен приходиться на центр или 2/3 высоты экрана. Линия взора должна быть перпендикулярна центру экрана и оптимальное её отклонение от перпендикуляра, проходящего через центр экрана в вертикальной плоскости, не должно превышать 5 градусов, допустимое 10 градусов. Рабочее место должно быть оборудовано подставкой для ног, имеющей ширину не менее 300 мм, глубину не менее 400 мм, регулировку по высоте в пределах до 150 мм и по углу наклона опорной поверхности подставки до 20 градусов.

5.2 Производственная безопасность

Производственная безопасность представляет собой систему организационных мероприятий и технических средств, уменьшающих вероятность воздействия на персонал опасных производственных факторов, вредных воздействий технологических процессов, энергии, средств, предметов, условий и режимов труда до приемлемого уровня. Необходимо выявить вредные и опасные производственные факторы, которые могут возникать при разработке и эксплуатации математической модели сернокислотного алкилирования изобутана бутиленами. Выбор факторов производится с использованием [33]. Выявленные факторы перечислены в таблице 5.1.

Таблица 5.1 - Опасные факторы производства сернокислотного алкилирования

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разработка	Изготовление	Эксплуатация	
1.Отклонение показателей микроклимата;	+	+	+	СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.

Продолжение таблицы 5.1

2.Повышенный уровень шума;	+	+	+	ГОСТ 12.4.011-89 (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация
3.Электрический ток;	+	+	+	ГОСТ 12.1.038-82 Электрическая безопасность. Защитное заземление, зануление.
4.Утечка вредных веществ;			+	ГОСТ 2184-2013 Кислота серная техническая. Технические условия; ГОСТ 4095-75 Изооктан технический. Технические условия;
5.Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СНиП 23-05-95 Естественное и искусственное освещение

5.3 Анализ выявленных вредных факторов при разработке, изготовлении и эксплуатации установки алкилирования

Производственное оборудование должно обеспечивать безопасность работающих при монтаже (демонтаже), вводе в эксплуатацию и эксплуатации в составе технологических комплексов при соблюдении требований (условий, правил), предусмотренных эксплуатационной документацией [34].

1. Отклонение показателей микроклимата

Характерной особенностью процесса является размещение оборудования на открытых площадках. В тёплый период года температура воздуха должна быть 20 - 22 °С, а в холодный период 22 - 24 °С, относительная влажность воздуха 30 - 60 %, скорость воздуха 0,2 - 0,7 м/с.

С целью защиты персонала от неблагоприятных метеорологических факторов контрольно-измерительные приборы располагают не на оборудовании, а тоже делают выносными и располагают в одном месте, которое снабжено навесом, либо крышей, чтобы человек имел возможность работать вне помещения при плохой погоде время пребывания на рабочих местах (непрерывно или суммарно за рабочую смену) должно быть ограничено в соответствии с СанПиНом 2.2.4.548-96 [35].

2. Повышенный уровень шума

Шум на установке сернокислотного алкилирования является следствием работы компрессоров и насосов больших мощностей. Требования по допустимому уровню звукового давления, звука и эквивалентных уровней звука выполняются в соответствии с [36], согласно которому уровень звука на УСА не превышает 80 ДБА. Продолжительный повышенный уровень шума является причиной возникновения глухоты, а также головных болей, гормонального расстройства и психических заболеваний.

В качестве средств индивидуальной защиты от шума в зависимости от конструктивного исполнения используются [36]:

- противошумные наушники, закрывающие ушную раковину снаружи;
- противошумные вкладыши, перекрывающие наружный слуховой проход или прилегающие к нему;
- противошумные шлемы и каски; противошумные костюмы.

3. Электрический ток

При сборке, настройке, подключении и эксплуатации реактора сернокислотного алкилирования возможно поражение электрическим током, что является опасным фактором. Поэтому конструкция производственного оборудования, приводимого в действие электрической энергией, должна включать устройства (средства) для обеспечения электробезопасности.

Производственное оборудование должно быть выполнено так, чтобы исключить накопление зарядов статического электричества в количестве, представляющем опасность для работающего, и исключить возможность пожара и взрыва.

Основные способы и средства электрозащиты [36]:

- изоляция токопроводящих частей и ее непрерывный контроль;
- установка оградительных устройств;
- предупредительная сигнализация и блокировки;

- использование знаков безопасности и предупреждающих плакатов;
- использование малых напряжений;
- электрическое разделение сетей;
- защитное заземление;
- выравнивание потенциалов;
- зануление;
- защитное отключение;
- средства индивидуальной электрозащиты.

4. Утечка токсичных и вредных веществ

Сырье процесса сернокислотного алкилирования изобутана бутиленом, получаемые полупродукты, а также готовая продукция являются вредными, взрывопожароопасными веществами, способными образовать в смеси с воздухом взрывопожароопасные и опасные для здоровья концентрации.

Процесс на каталитической установке протекает при невысоких температурах (до 13 °С). Ядовитые вещества проникают в организм человека через органы дыхания. Это представляет значительную опасность, поскольку слизистая оболочка носа и дыхательной поверхности легких обладает высокой всасывающей способностью. Продуктом данного процесса является алкилат, он относится к ядовитым (токсичным) веществам.

В состав выделяющихся на производстве газов, кроме паров ББФ и изобутановой фракции входят газы серной кислоты:

- серная кислота и олеум — очень едкие вещества. Они поражают кожу, слизистые оболочки, дыхательные пути (вызывают химические ожоги) При вдыхании паров этих веществ они вызывают затруднение дыхания, кашель, нередко — ларингит, трахеит, бронхит и т. д.
- бутан-бутиленовая и изобутановая фракции - нервный яд действует на центральную нервную систему. При остром отравлении повышается возбудимость, появляется тошнота, головокружение, при попадании на кожу вызывает обморожение.

Таблица 5.2 – Предельно-допустимые концентрации токсичных веществ в воздухе рабочей зоны [37]

Наименование	ПДК рабочей зоны, мг/м ³	Класс опасности
Серная кислота	1	2
ББФ	100	4
Изобутановая фракция	300	4
Алкилат	300	4

Для предотвращения попадания на кожу вредных химических веществ используют резиновые перчатки, лабораторные халаты, шапочки, обувь. Для защиты дыхательных путей от действия вредных химических веществ служат специальные ватно-марлевые повязки, респираторы, противогазы. Для защиты слизистой оболочки глаз можно использовать специальные очки.

5. Недостаточная освещенность рабочей зоны

Недостаточная освещенность рабочей зоны на рабочем месте оператора развивает утомляемость, что увеличивает вероятность ошибочных действий (Таблица 5.3).

Таблица 5.3 – Нормы освещенности рабочих мест [38]

Наименование помещений/вида деятельности	$E_{\text{экс}}$, ЛК	U_0 , не менее	R , не более	R_a , не более	K_n , не более
Производственные процессы с дистанционным управлением	50	0,4	-	20	-
Процессы с частичным применением ручного труда	150		28	40	
Постоянная ручная работа	300	0,6	22	80	20
Лаборатория	500		16		10

При недостатке на рабочем месте естественного можно выполнить следующие мероприятия [38]:

- уменьшение времени пребывания работника в данном помещении;
- улучшение условий, создаваемых искусственным освещением;
- анализ степени загрязнения стекол в светопроемах, их чистка и последующие контрольные измерения;
- косметический ремонт помещения с использованием светлых отделочных материалов.

5.4 Экологическая безопасность

Основными загрязнителями атмосферы на производстве разрабатываемой модели алкилирования изобутана бутиленами являются пары серной кислоты и щелочи.

Повышения экологической безопасности можно достигнуть путем снижения выбросов во время эксплуатации за счет использования улучшенных фильтрационных и очистительных сооружений.

Общие профилактические мероприятия, направленные на сокращение и уменьшение воздействия на окружающую среду:

- устройство и озеленение площадки;
- поддержание в полной технической исправности и герметичности резервуаров и емкостей, технологического оборудования и трубопроводов;
- контроль сварных стыков физическими методами;
- гидравлическое испытание трубопроводов, резервуаров и оборудования на прочность и герметичность;
- контролируемый и планируемый слив воды после гидроиспытаний;
- высокие требования к качеству металла труб;
- необходимый запас надежности по толщине стенки труб;

Общие технологические мероприятия, направленные на сокращение и уменьшение воздействия на окружающую среду:

- покрытие оборудования и трубопроводов антикоррозионной изоляцией;
- защита оборудования от атмосферной коррозии;
- система постоянного контроля регламентированных значений технологических параметров, автоматическое регулирование и система ПАЗ при отклонении от заданных параметров для предупреждения аварийных ситуаций.

1. Основные мероприятия по охране атмосферного воздуха

С целью снижения неорганизованных выбросов вредных веществ в атмосферу через неплотности аппаратов, арматуры, фланцевых соединений, уплотнений предусмотрены следующие мероприятия:

- применение герметичных аппаратов и трубопроводов под давлением;
- применение технологического оборудования и запорно-регулирующей арматуры в соответствии с рабочими параметрами процесса и коррозионной активностью среды;
- предусмотрена система предохранительных клапанов для защиты аппаратов и трубопроводов от превышения давления;
- сбор утечек от насосов технологического оборудования предусмотрен в емкости закрытой дренажной системы опасных стоков;
- непрерывный контроль загазованности в местах максимально возможных выделений углеводородов;
- периодический контроль максимально разовой ПДК не реже 1 раза в квартал (для веществ III, IV классов опасности), не реже 1 раза в месяц (для веществ II класса опасности);

2. Основные мероприятия по защите поверхностных вод

Для защиты поверхностных вод предусмотрены следующие мероприятия:

- открытая дренажная система поверхностных стоков;
- открытая дренажная система опасных стоков;

- закрытая дренажная система;
- установка запорной секционирующей арматуры для локализации аварийных разливов нефтепродуктов в случае разгерметизации оборудования и трубопроводов.

3. Основные мероприятия по охране почв

Для защиты почв при эксплуатации месторождения предусмотрены следующие мероприятия:

- выполнение строительных работ исключительно в пределах монтажной площадки;
- организация площадок для сбора и хранения отходов производства и потребления;
- сдача отходов производства и потребления осуществляется в специализированную организацию;
- устройство ограждений вокруг технологических резервуаров;

5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Технологические процессы на установке алкилирования относятся к взрывопожароопасному производству, вследствие ведения технологического процесса при наличии взрывоопасных или горючих веществ. Помимо этого, производство считается опасным в связи с:

- применением в производстве раствора щелочи $10 \div 15 \%$;
- применением электроэнергии высокого напряжения для эксплуатации насосного оборудования;
- возможностью нарушения герметичности аппаратов и трубопроводов из-за коррозии;
- возможностью продуктов аккумулировать заряды статического электричества при транспортировании.

В аварийных ситуациях технологический персонал установки алкилирования должен соблюдать План о локализации и ликвидации

аварийных ситуаций. При возникновении ЧС, мероприятия представляют собой проведение спасательных работ и неотложных аварийно-восстановительных работ в очаге поражения. Действия персонала определяются в соответствии с СНиП 21-01-97 [39].

Для обеспечения безаварийной работы установки и достижения минимального уровня взрывопожароопасности процесса предусмотрены следующие мероприятия:

- все стадии технологического процесса непрерывны и склонны к устойчивому протеканию;
- при соблюдении правил эксплуатации процесс не обладает возможностью взрыва внутри технологической аппаратуры;
- контроль и управление процессом осуществляется автоматически и дистанционно из операторной с использованием электронной системы приборов;

В соответствии с требованием норм по пожаротушению на установке должны быть предусмотрены первичные и стационарные средства пожаротушения, а также пожарная сигнализация.

На установке предусмотрены следующие средства пожаротушения [40]:

- первичные средства пожаротушения (огнетушители – пенные ОХП-10, ОПС-10г, углекислотные ОУ-5, ОУ-8; кошмы, ящики с песком, лопаты и т.д.);
- стационарная система пенотушения открытой насосной;
- водяная оросительная система колонных аппаратов;
- пожарные краны в помещении компрессорной.

Вывод:

Модель установки сернокислотного алкилирования спроектирована в соответствии с требованиями [41].

Герметичность технологической обвязки узлов исключает загрязнение воздуха рабочей зоны вредными и взрывоопасными веществами в соответствии с [42, 43] и исключает недопустимые тепловыделения.

Разработка комплекса мер, направленных на модернизацию производства в целях улучшения условий труда позволит в значительной мере улучшить условия труда работающих и сведет к минимуму угрозы возникновения ЧС. При разработке данных мер, крайне важно учитывать не только отечественные разработки и результаты, но и международный опыт, что позволит осуществить совершенствование нормативной правовой базы Российской Федерации в соответствии с международными нормами.

Заключение

В данной работе был проведен термодинамический анализ реакций, участвующих в процессе алкилирования изобутана бутиленом, в ходе которого были выявлены термодинамически разрешенные реакции. На основе термодинамического анализа, была составлена формализованная схема превращений, которая обеспечивает чувствительность модели к изменению технологических параметров (температура, расход изобутановой фракции, состав сырья) и не усложняет расчеты, так как не учитывает реакции, практически не влияющие на ОЧ алкилата.

На основе формализованной химической модели была составлена кинетическая модель, в которой расписаны скорости химических реакций. Далее составлены уравнения покомпонентного материального и теплового балансов, где для описания гидродинамики была выбрана модель идеального смешения, как наиболее рациональная.

Разработанная математическая модель позволяет определять состав алкилата, его октановое число, и их зависимость от температуры и расхода изобутановой фракции. А также позволяет подбирать наиболее оптимальные технологические условия процесса для различного состава сырья.

Расчеты, произведенные при помощи данной модели, показали, что при увеличении расхода циркулирующего изобутана при постоянных технологических параметрах происходит увеличение соотношения изобутановой фракции к олефиновой, это приводит к снижению качества алкилата, что обусловлено увлечением скоростей побочных реакций и уменьшением скоростей целевых.

По результатам исследования наиболее оптимальным температурным режимом является диапазон температур от минус 5°C до 0°C, это связано с тем, что скорость побочных реакций намного ниже скорости целевых. При увеличении температуры выше 0°C скорости побочных реакций уменьшается медленнее, чем скорость целевых реакций, также среди побочных реакций

существуют эндотермические, чья скорость с увеличением температуры возрастает.

Адекватность модели была проверена на основании данных, полученных с предприятия за 18.12.2018. Расчетные и практические значения концентраций веществ в составе алкилата схожи и имеют малую погрешность, которая в основном связана с составом сырья и отсутствием побочных реакций, которые практически не влияют на ОЧ продукта, что подтверждается погрешностью в 0,74% между расчетным и практическим ОЧ.

Список использованных источников

1. Басимов Р.А., Павлов М.Л., Прокопенко А.В. Основные этапы развития и современного состояния процесса получения этилбензола. Нефтепереработка и Нефтехимия – 2009. – №2. – С.24-28.
2. Производство стирола комбинированным процессом алкилирования бензола этиленом и дегидрирования этилбензола [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://is.gd/vqCgyW> (дата обращения 2.03.2019).
3. Филимонова Е.И. Основы технологии переработки нефти. Учебное пособие. Ярославль: Изд-во ЯГТУ, 2010. - 171с.
4. Кравцов А.В., Ушева Н.В., Кузьменко Е.А., Федоров А.Ф. Математическое моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие: учебное пособие. – Томский политехнический университет. – 4-е изд. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2013. – 136с.
5. Солодова Н.Л., Хасанов И.Р. Перспективные процессы алкилирования изопарафинов олефинами // Вестник технологического университета. – 2015. – №9. – С.117-121.
6. Бадикова А. Б. Усовершенствование процесса сернокислотного алкилирования изоалканов олефинами: автореф. дисс. к. т. н., Башкирский гос. университет. – Уфа, 2000 г. – 158с.
7. Дорогочинский А.З. и др. Сернокислотное алкилирование изопарафинов олефинами. –М.: Химия, 1970– 270с.
8. Каталитическое С-алкилирование изобутана олефинами [Электронный ресурс] – Режим доступа: https://www.neft-product.ru/info_detail-172.html (дата обращения 5.03.2019).
9. Г. С. Кутузова. Алифатические и ароматические углеводороды и их производные с моно- и полифункциональными группами / Казанский государственный технологический университет; Нижнекамский химикотехнологический институт. – Казань: Изд-во Казанского ГТУ, 2004. – 52с.

10. Дышкант М.С. Изучение влияния основных технологических факторов процесса фтористоводородного алкилирования на выход и качество целевого продукта // Вестник Полоцкого государственного университета. – 2011. – С.123-129.
11. Ибрагимов Г.М. Низкая глубина переработки углеводородного сырья – проблема нефтеперерабатывающей промышленности России// Экономические науки. – 2011. – №3. – С.122.
12. Сухорослова М.М., Новиков В.Т., Бондалетов В.Г. Лабораторный практикум по химии и технологии органических веществ. – Томск: Изд. ТПУ, 2002 – 132с.
13. Ушева Н.В., Мойзес О.Е., Митянина О.Е., Кузьменко Е.А. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Учебное пособие. - Томск: ТПУ, 2014. - 135с.
14. Гартман Т. Н., Клушин Д. В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учебное пособие. – М.: Академкнига, 2006. – 416с.
15. Ким А.М. Органическая химия: учеб. пособие. - Новосибирский государственный педагогический университет. - 4-е изд. испр. и доп. - Новосибирск: Сибирское унив. изд-во, 2004. – 842с.
16. Стась, Н. Ф. Справочник по общей и неорганической химии: учеб. пособие для прикладного бакалавриата / Н. Ф. Стась. - 4-е изд. - М.: Изд-во Юрайт, 2018. - 92с.
17. П. Г. Баннов. Процессы переработки нефти. – М.: ЦНИИТ Энефтехим, 2001. – 625с.
18. Солодова Н.Л., Абидуллин А.И., Емельянычева Е.А. Алкилирование изопарафинов олефинами // Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – №18. – С.253-258.
19. Технологический регламент установки серноокислотного алкилирования ТР-2-009-214-13, 2013 г.

20. Сталл. Д., Вестрам Э., Гзинке. Химическая термодинамика органических соединений. – М.: Изд-во Мир, 1971. - 831с.
21. Досон Р., Эллиот Д., Эллиот У., Джонс К. Справочник биохимика. - М.: Мир, 1991. - 90с.
22. Подвинцев И.Б. Нефтепереработка практический вводный курс. Учеб. пособие. – М.: Изд-во ИД «Интеллект», 2015. – 157с.
23. Технологический регламент установки сернокислотного алкилирования ТР-25-12, 2013 г.
24. Ахметов С.А. Технология глубокой переработки нефти и газа. Учеб. пособие для вузов. - Уфа: Изд-во Гилем, 2002. - 672с.
25. Беляев В.М., Миронов В.М. Конструирование и расчет элементов оборудования отрасли. Ч.1: Тонкостенные сосуды и аппараты химических производств. - Томск: Изд-во Томского Политехнического университета, 2011. - 300с.
26. Семакина О.К. Машины и аппараты химических производств. Ч. 1. Учеб. пособие. - Томск: Изд-во Томского Политехнического университета, 2003. - 118с.
27. Производство высокооктановых бензинов [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://clck.ru/Fy5Nd> (дата обращения 12.03.2019).
28. Российская технология сернокислотного алкилирования изобутана олефинами [Электронный ресурс] // Брошюра компании ГК РАН. – Режим доступа: <https://is.gd/SLum38> (дата обращения 20.03.2019).
29. GaussView 6 [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://gaussian.com/dft/> (дата обращения 5.05.2019).
30. Кудряшева, Н. С. Физическая химия: учебник для бакалавров / Н. С. Кудряшева, Л. Г. Бондарева. — М.: Издательство Юрайт, 2012. — 340 с.
31. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы (с изменениями на 21 июня 2016 года). - М.: Федеральный центр госсанэпиднадзора Минздрава России, 2003. – 56с.


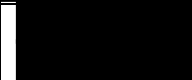






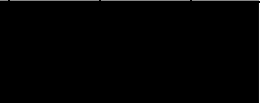
32. "Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019). Статья 354.
33. Алкилирование. Исследования и промышленное оформление процесса /под ред. Л.Ф.Олбрайта и А.Р. Голдсби. - М., Химия. - 1982. - 342с.
34. ГОСТ 12.1.003-2014. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности. - М.: Стандартинформ, 2015. – 28с.
35. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. - М.: Информационно-издательский центр Минздрава России, 1997. – 20с.
36. ГОСТ 12.4.011-89. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация. - М.: ИПК Издательство стандартов, 2001. – 8с.
37. ГН 2.2.5.3532-18. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны. 2018. – 170с.
38. ГОСТ Р 55710 - 2013. Освещение рабочих мест внутри зданий. Нормы и методы измерений. - М.: Стандартинформ, 2016. – 20с.
39. СНиП 21-01-97*. Пожарная безопасность зданий и сооружений (с Изменениями N 1, 2). - М.: ГУП ЦПП, 2002. – 38с.
40. Приказ Ростехнадзора от 25.03.2014 N 116 [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/542627299> (дата обращения 22.05.2019).
41. Рекомендации по устройству и безопасной эксплуатации технологических трубопроводов. Приказ от 27 декабря 2012 года N 784 [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://docs.cntd.ru/document/542627299> (дата обращения 22.05.2019).
42. Ибрагимов Г.З., Артемьев В.Н. Техника и технология добычи и подготовки нефти и газа. – М.: МГОУ, 2005. – 243с.

43. Касаткин, А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии / А.Г. Касаткин. – М.: ООО «Издательский дом Альянс», 2015. – 753с.
44. ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов (с Изменением N 1). - М.: ИПК Издательство стандартов, 2001. - 7с.
45. ГОСТ 2184-2013. Кислота серная техническая. Технические условия (с Поправками). - М.: Стандартиформ, 2014. – 37с.
46. ГОСТ 4095-75. Изооктан технический. Технические условия (с Изменениями N 1, 2, 3). - М.: Стандартиформ, 2009. – 6с.
47. СНиП 23-05-95*. Естественное и искусственное освещение (с Изменением N 1). - М.: Госстрой России , ГУП ЦПП, 2003. – 107с.

Приложение Е

(справочное)

Таблица Е.1 - Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№ работ	Вид работ	Исполнители	Т _{кп} , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ											
				февраль			март			апрель			май		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	Получение задания и составление плана работ	Руков.,инженер	1												
2	Литературный обзор	Инженер	20												
3	Изучение технологического процесса	Инженер	8												
4	Теоретический анализ	Руков.,инженер	13												
5	Расчет термодинамических и кинетических параметров	Инженер	16												
6	Обработка результатов	Руков.,инженер	9												
7	Оформление таблиц, данных, графиков	Инженер	10												
8	Обсуждение результатов	Руков.,инженер	5												
9	Разработка презентации и раздаточного материала	Инженер	30												



- Инженер



- Руководитель